

2 Propriétés de l'argon (10 points)

L'argon est un gaz rare qui cristallise sous forme cubique à faces centrées (CFC) aux très basses températures. Les liaisons inter-atomiques de type Van der Waals assurant la cohésion d'un tel solide sont bien décrites par un potentiel de Lennard-Jones :

$$\phi(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

où r est la distance entre deux atomes, et ϵ et σ sont des paramètres empiriques.

- 1/10 1. Donnez la coordinnence Z de la structure cristalline, et exprimez la distance d_1 entre plus proches voisins en fonction du paramètre de maille a .
- 1/10 2. Dénombrez les 2^d voisins (Z_2), c'est-à-dire les 2^e plus proches dans la structure CFC, et exprimez leurs distances d_2 en fonction du paramètre de maille a .
- 2/10 3. En supposant que l'énergie E d'un cristal constitué de N atomes est la somme des énergies de paire des 1^{er} et 2^e voisins, exprimez cette énergie en fonction du paramètre de maille a de la structure.
- 1/10 4. Déduisez de la question précédente l'expression littérale de a_0 (valeur d'équilibre à 0 K) en fonction des paramètres empiriques du potentiel de Lennard-Jones.
- 1/10 5. Calculez la valeur de a_0 (en Å) pour l'argon solide à partir des données numériques.
- 1/10 6. Exprimez littéralement l'énergie de cohésion E^{coh} du cristal en fonction des mêmes paramètres empiriques.
- 1/10 7. En déduire la valeur de l'énergie de cohésion E_m^{coh} d'une mole d'atomes d'argon cristallisé à partir des données numériques (cette énergie sera exprimée en J/mol).
- 1/10 8. Commentez la valeur de l'énergie molaire de cohésion ainsi obtenue par rapport à celle mesurée de l'énergie de vaporisation $E_m^{\text{vap}} = 6447 \text{ J/mol}$.
- 1/10 9. Quelle est la caractéristique du potentiel $\phi(r)$ qui joue le rôle prépondérant dans les constantes élastiques du solide ? 1/2
- 1/10 10. Expliquez qualitativement le phénomène de dilatation thermique à partir de la dépendance de l'énergie du cristal vis-à-vis du paramètre de maille a .

Données

$$\begin{aligned} \sigma &= 3,4 \text{ Å} \\ \epsilon &= 0,01 \text{ eV} \\ 1 \text{ eV} &= 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J} \\ N &= 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1} \end{aligned}$$

combinaison.